

TERMOQUÍMICA

Es la parte de la Química que se encarga del estudio del intercambio energético de un sistema químico con el exterior.

Hay sistemas químicos que evolucionan de reactivos a productos desprendiendo energía. Son las reacciones **exotérmicas**.

Otros sistemas químicos evolucionan de reactivos a productos precisando energía. Son las reacciones **endotérmicas**.

SISTEMAS

Es una parte pequeña del universo que se aísla para someterla a estudio.

El resto se denomina **ENTORNO**.

Pueden ser:

- **Abiertos** (intercambia materia y energía con el entorno).
- **Cerrados** (no intercambia materia y sí energía).
- **Aislados** (no intercambia ni materia ni energía).

En las reacciones químicas:

SISTEMAS = Conjunto de Sustancias químicas (reactivos y productos)



VARIABLES TERMODINÁMICAS

Son magnitudes macroscópicas que definen o determinan el estado de un sistema en un momento dado. Pueden variar a lo largo de un proceso (por ejemplo, en el transcurso de una reacción química). Reflejan las propiedades microscópicas del sistema (Ej la temperatura refleja la E_c de las moléculas)

Ejemplos:

- Presión.
- Temperatura.
- Volumen.
- Concentración.

FUNCIONES DE ESTADO

Son variables termodinámicas cuyo **valor no depende del camino seguido para llegar a ese estado.**

Su variación sólo depende del estado inicial y final y no del camino desarrollado.

Son funciones de estado: Presión, temperatura, energía interna, entalpía.

NO lo son: calor, trabajo.

PROCESOS TERMODINÁMICOS.

Tienen lugar cuando se observan cambios en las variables termodinámicas de un sistema.

Pueden ser de dos tipos: Reversibles e Irreversibles.

Cuando permanece constante alguna propiedad del proceso recibe el nombre de :

Isotérmico ($T = \text{cte}$), Isobárico ($P = \text{cte}$), Isocórico ($V = \text{cte}$) y adiabático cuando transcurre sin intercambio de calor.

CALOR Y TRABAJO EN UN PROCESO

- **Intercambio de calor**

Llamamos calor (Q) a la energía en tránsito que pasa de un cuerpo a otro cuando éstos están a distinta temperatura. **El calor, por tanto, es energía en tránsito de un cuerpo a otro.** Por consiguiente, sus unidades serán las establecidas para la energía (J), aunque a menudo se mida en calorías (cal) o en kilocalorías ($1 \text{ kcal} = 10^3 \text{ cal}$, $1 \text{ J} = 0,24 \text{ cal}$).

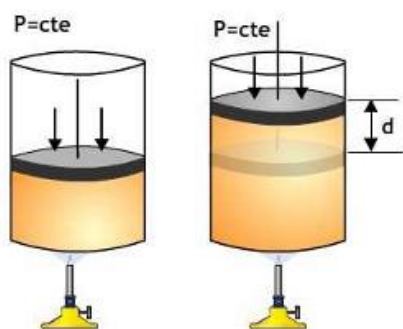
El cálculo del calor intercambiado Q depende de:

Si modifica la temperatura: $Q = mc_e \Delta T$

Si hay cambio de estado: $Q = mL_{f,v}$

- **Realización de trabajo**

El trabajo (W) nos da la energía transferida a un sistema cuando sobre él actúa una fuerza. Si sobre el sistema considerado actúa alguna fuerza externa, puede transferirse energía entre el sistema y el exterior que podemos evaluar calculando el trabajo realizado por la fuerza. En las reacciones químicas en que se producen cambios de P o de V , hay intercambios de trabajo del sistema con el entorno.



$$W = F \cdot d = P \cdot S \cdot d = P \cdot \Delta V$$

PRIMER PRINCIPIO DE LA TERMODINÁMICA

ENERGÍA INTERNA (U): Es la energía total del sistema, suma de energías cinéticas de vibración, etc, de todas las moléculas.

- Es imposible medirla.
- En cambio, sí se puede medir su variación.
- U es función de estado.

Aplicando el Principio de Conservación de la Energía podemos calcular la variación de energía interna de un sistema, lo que constituye el Primer Principio de la Termodinámica (que no es más que una forma de enunciar el Principio de Conservación de la Energía)

$$\Delta U = Q + W$$

La variación de energía interna de un sistema viene dada por la suma algebraica del calor absorbido/desprendido y el trabajo realizado por el sistema o en su contra.

Por convenio el calor tiene signo positivo cuando es absorbido por el sistema (su energía interna aumenta) y negativo si es cedido por el sistema (su energía interna disminuye).

Por convenio, el trabajo tiene signo positivo cuando es realizado contra el sistema (por ejemplo cuando se comprime un gas), ya que su energía interna aumenta; y negativo si es realizado por el sistema (por ejemplo cuando un gas se expande), ya que su energía interna disminuye.

Así, Q y $W > 0$ si se realizan a favor del sistema.

Si consideramos, a modo de ejemplo, un sistema donde un gas encerrado en un cilindro se calienta y se expande a presión constante, y suponemos que se comunican 25 J de energía en forma de calor y que el trabajo de expansión vale 10 J. La variación de energía interna del gas sería:

$$\Delta U = Q + W = 25 \text{ J} - 10 \text{ J} = 15 \text{ J}$$



Trabajo de expansión para un gas ideal en un proceso a presión constante

Teniendo en cuenta que podemos saber la fuerza externa sobre el émbolo (de superficie, S) si conocemos la presión externa (P), podemos calcular el trabajo realizado por el gas contra la fuerza externa:

Si la expansión del gas se provoca no calentando, sino aumentando la cantidad de gas (reacciones químicas, vaporización, etc.), y suponiendo comportamiento ideal, podemos poner:

$$\left. \begin{array}{l} W = -P \Delta V \\ P \Delta V = \Delta n RT \end{array} \right\} W = -P \Delta V = -\Delta n RT$$

Actividad: 4, 5, 6 pág 144

CALOR A VOLUMEN CONSTANTE (Q_V)

Es el intercambio de energía en un recipiente cerrado que no cambia de volumen.

Si $V = \text{constante}$, es decir, $\Delta V = 0 \Rightarrow W = 0 \Rightarrow$

$$Q_V = \Delta U$$

CALOR A PRESIÓN CONSTANTE (Q_p)

La mayoría de los procesos químicos ocurren a presión constante, normalmente la atmosférica.

En este caso, como $p = \text{cte}$, se cumple que $W = -p \cdot \Delta V$ (el signo negativo se debe al criterio de signos adoptado). Si $\Delta V > 0$ el sistema realiza un trabajo hacia el entorno y en consecuencia pierde energía.

$$\Delta U = Q_p - p \cdot \Delta V \Rightarrow U_2 - U_1 = Q_p - p \cdot (V_2 - V_1)$$

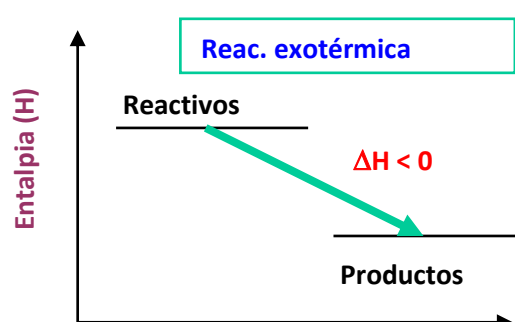
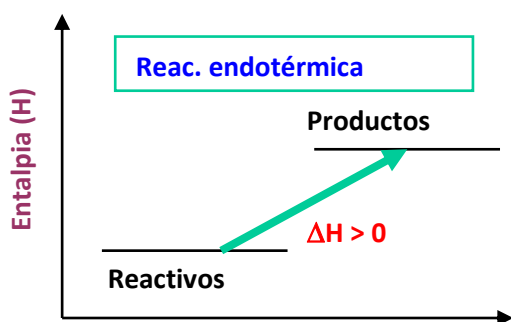
$$Q_p = U_2 + p \cdot V_2 - (U_1 + p \cdot V_1)$$

Llamaremos **entalpía " H "** a " $U + p \cdot V$ " de manera que:

$$H_1 = U_1 + p \cdot V_1 \quad H_2 = U_2 + p \cdot V_2$$

Con lo que queda: $Q_p = H_2 - H_1 = \Delta H$

H es una función de estado.



Relación Q_v con Q_p

En gases aplicando la ecuación de los mismos:

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

Si p y T son constantes, la ecuación se cumplirá para los estados inicial y final: ($p \cdot V_1 = n_1 \cdot R \cdot T$) ($p \cdot V_2 = n_2 \cdot R \cdot T$) con lo que restando ambas expresiones también se cumplirá que:

$$P \cdot \Delta V = \Delta n \cdot R \cdot T$$

Como $\Delta H = \Delta U + p \cdot \Delta V$ se cumplirá que: $\Delta H = \Delta U + \Delta n \times R \times T$

En reacciones de sólidos y líquidos apenas se produce variación de volumen. En las reacciones en que el nº de moles de reactivos y productos son iguales, en ambos casos se cumple que $Q_v \cong Q_p$, es decir:

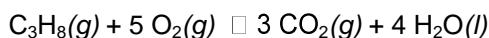
$$\Delta U \cong \Delta H$$

En termoquímica el valor de R suele tomarse en unidades del sistema internacional.

$$R = 8,3 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

Ejemplo:

Determinar la variación de energía interna para el proceso de combustión de 1 mol de propano a 25°C y 1 atm, si la variación de entalpía, en estas condiciones, vale -2219,8 kJ.



$$\Delta H = -2219,8 \text{ kJ}$$

$$n_{\text{reactivos}} = 1 + 5 = 6 ; n_{\text{productos}} = 3 \text{ (sólo moles de gases)} \rightarrow \Delta n = -3$$

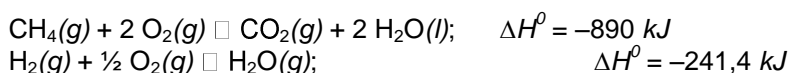
$$\Delta U = \Delta H - \Delta n \times R \times T = -2219 \text{ kJ} + 3 \text{ mol} \times (8,3 \text{ J mol}^{-1} \text{K}^{-1}) \times 298 \text{ K} = \mathbf{-2214 \text{ kJ}}$$

****Actividades: 7 y 8 (pág. 145)

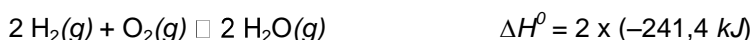
Ecuaciones termoquímicas

Son ecuaciones químicas que expresan tanto los reactivos como los productos con sus coeficientes estequiométricos correspondientes, indicando entre paréntesis su estado físico, y a continuación la variación energética expresada como ΔH (habitualmente como ΔH°).

Ejemplos:



¡CUIDADO!: ΔH depende del número de moles que se forman o producen. Por tanto, si se ajusta poniendo coeficientes dobles, habrá que multiplicar ΔH° por 2:



ENTALPÍA ESTÁNDAR DE FORMACIÓN (CALOR DE FORMACIÓN).

Es la variación de entalpía del proceso en el que se forma **1 mol** de ese compuesto a partir de sus elementos, que se encuentran en condiciones estándar y en su estado físico normal.

Por convenio, la entalpía de formación de los elementos en condiciones estándar y en su estado físico normal a 25°C, es 0

Se expresa como ΔH_f° . Se trata de un "calor molar". Por tanto, se mide en kJ/mol.

Ejemplos:



ENTALPÍA ESTÁNDAR DE LA REACCIÓN

Se llama entalpía de reacción a la variación de la entalpía de una reacción en la cual, tanto reactivos como productos están en condiciones estándar ($p = 1 \text{ atm}$; $T = 298 \text{ K} = 25^\circ\text{C}$; concentración de sustancias disueltas = 1 M).

Se expresa como ΔH_R° y como se mide en J o kJ, su valor depende de cómo se ajuste la reacción.

$$\Delta H^0_R = \sum H^0_{\text{Productos}} - \sum H^0_{\text{Reactivos}}$$

Aplicando esta ecuación a la reacción de formación de reactivos y productos:

$$H^0_{\text{Productos}} = \Delta H^0_f \text{ de los productos; } H^0_{\text{Reactivos}} = \Delta H^0_f \text{ de los reactivos.}$$

ya que la entalpía de los elementos por convenio es 0.

$$\text{Por lo tanto: } \Delta H^0_R = \sum \Delta H^0_f (\text{Productos}) - \sum \Delta H^0_f (\text{Reactivos})$$

****Actividades: 16 y 17 (pág. 170,171)

ENTALPÍA ESTÁNDAR DE COMBUSTIÓN

Caso específico de calor o entalpía de reacción para la reacción de combustión. Se calcula igual que ΔH^0_R . La reacción de combustión siempre se producen con oxígeno, en combustibles orgánicos produce CO_2 y H_2O . Está definida para 1 mol de sustancia que sufre la combustión. (Variación de entalpía el proceso en el cual 1 mol de dicha sustancia reacciona con O_2).

****Actividades: 16 (pág. 151)

LEY DE HESS.

" ΔH " en una reacción química es constante con independencia de que la reacción se produzca en una o más etapas.

Por ser H una función de estado, cuando una ecuación química se puede expresar como combinación lineal de otras, podremos igualmente calcular ΔH de la reacción global combinando los ΔH de cada una de las reacciones.

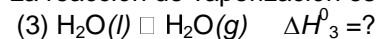
Ejemplo:

Dadas las reacciones:



calcular la entalpía de vaporización del agua en condiciones estándar.

La reacción de vaporización es:

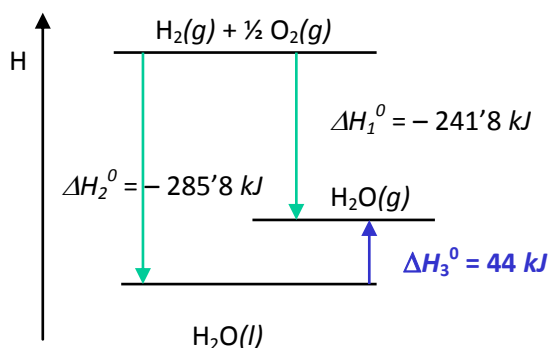


(3) puede expresarse como $(1)-(2), \Rightarrow$

$$\Delta H_3^0 = \Delta H_1^0 - \Delta H_2^0 =$$

$$-241,8 \text{ kJ} - (-285,8 \text{ kJ}) = 44 \text{ kJ}$$

$$\Delta H^0_{\text{vaporización}} (\text{agua}) = 44 \text{ kJ} \times \text{mol}^{-1}$$



Esquema de la ley de Hess

***Actividades: 18 y 22 (pág. 171)

ENERGÍA DE ENLACE.

“Es la energía necesaria para romper un mol de enlaces entre átomos”.

La entalpía de una reacción también se puede calcular:

$$\Delta H_R = \sum \Delta H_{\text{enlaces rotos}} - \sum \Delta H_{\text{enlaces formados}}$$

***Actividades: 19 (pág. 153)

SEGUNDO PRINCIPIO DE LA TERMODINÁMICA

Trata de explicar la espontaneidad de un proceso Químico.

Son procesos espontáneos: el enfriamiento de un cuerpo más caliente que su entorno, mezcla de agua y vino, evaporación de alcohol, disolución de sales.....Hay procesos espontáneos exotérmicos y endotérmicos. Luego además del ΔH **debe haber otro factor que determine si va a ocurrir o no el proceso.**

La experiencia muestra que en los procesos espontáneos aumenta el desorden del universo.

Se define una función termodinámica que mida el grado de desorden de un sistema:

ENTROPÍA (S)

La entropía es una medida del desorden del sistema que sí puede medirse y tabularse. **Cuanto más desordenado esté un sistema, mayor será su entropía; cuanto más ordenado, menor entropía.**

Se puede evaluar (cualitativamente) la variación de entropía de algunos procesos comunes y ligados a las reacciones químicas. Algunos ejemplos:

- Obtener una disolución mezclando soluto y disolvente.
El estado inicial con el soluto y el disolvente sin mezclar puede suponerse más ordenado que el estado final, soluto y disolvente mezclados, luego: $\Delta S^0 > 0$
- Reacción en la que partimos de reactivos en estado líquido o sólido y se forma un gas como producto.
Un gas es un sistema menos ordenado que un líquido o un sólido, luego: $\Delta S^0 > 0$
- Reacción en la que aumenta el número de moles gaseosos al pasar de los reactivos a los productos:
Más cantidad de gas supone mayor desorden, luego: $\Delta S^0 > 0$
- Los compuestos con enlaces más fuertes, tienen menos entropía que los compuestos con enlaces más débiles:
Así el etano (enlace sencillo C-C) tiene mayor entropía que el eteno (enlace doble) y éste mayor que el etino (enlace triple).
- Si consideramos compuestos similares, o con masas atómicas parecidas, tiene mayor entropía el que tenga mayor número de átomos.
El SO_3 tiene una mayor entropía que el SO_2 .

“En cualquier proceso espontáneo la entropía total del universo tiende a aumentar siempre”.(segundo P de la Termodinámica)

$$\Delta S(\text{universo}) = \Delta S(\text{sistema}) + \Delta S(\text{entorno}) \geq 0$$

A veces el sistema pierde entropía (se ordena) espontáneamente. En dichos casos el entorno se desordena.

- **La entropía es una función de estado** $\Delta S = S_{\text{final}} - S_{\text{inicial}}$
- Se puede calcular su incremento:

$$\Delta S = \frac{Q}{T}$$
 Sus unidades son J/K.
 S^0 (entropía molar estándar) se mide en $J \cdot \text{mol}^{-1} \cdot K^{-1}$.
- **La entropía en el universo no se conserva. (a diferencia de la energía).** La entropía está incrementándose en todos los procesos naturales (espontáneos), cuando alcance su máximo valor (máximo desorden, ¿) podrán darse más procesos Físico-Químico en el universo? ¿se llegaría a la denominada muerte térmica del universo?

Por tanto, aplicándolo a las reacciones químicas:

$$\Delta S^0_R = \sum S^0_{\text{Productos}} - \sum S^0_{\text{Reactivos}}$$

TERCER PRINCIPIO DE LA TERMODINÁMICA

El **cero de entropía** se correspondería con lo que podríamos considerar un grado de desorden cero en la sustancia considerada, de ahí que **se considera nula la entropía de una sustancia cristalina perfecta en el cero absoluto**. Esta sugerencia para fijar el cero de entropía se debe a **Planck** (1912) y constituye el enunciado del **Tercer Principio de la Termodinámica**.

En la práctica se considera nula la entropía de una sustancia pura, en estado sólido, a 0 K.

Se denomina **entropía molar estándar** de una sustancia, S^0 , al incremento **de entropía de un mol de dicha sustancia en condiciones estándar con respecto a la que le corresponde en el cero absoluto**

- “La entropía de cualquier sustancia a 0 K es igual a 0” (máximo orden). Equivale a decir que no se puede bajar de dicha temperatura (0 absoluto)
- Las S de los elementos en condiciones estándar no son “0” sino que son positivas.
- Existen tablas de S^0 (entropía molar estándar) de diferentes sustancias.

Ejemplo:

Calcula ΔS^0 para las siguientes reacciones químicas: **a)** $N_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2 NO(g)$; **b)** $3 H_2(g) + N_2(g) \rightarrow 2 NH_3(g)$. **Datos:** S^0 ($J \cdot \text{mol}^{-1} \cdot K^{-1}$): $H_2(g) = 130,6$; $O_2(g) = 205$; $N_2(g) = 191,5$; $NO(g) = 210,7$; $NH_3(g) = 192,3$

$$\text{a) } \Delta S^0 = 2 \text{ mol} \times 210,7 \text{ J} \times \text{mol}^{-1} \times K^{-1} - (191,5 \text{ J} \times \text{mol}^{-1} \times K^{-1} + 205 \text{ J} \times \text{mol}^{-1} \times K^{-1}) = \mathbf{24,9 \text{ J} \times K^{-1}}$$

$$\text{b) } \Delta S^0 = 2 \times 192,3 \text{ J} \times K^{-1} - (3 \text{ mol} \times 130,6 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \times K^{-1} + 191,5 \text{ J} \times K^{-1}) = \mathbf{-198,7 \text{ J} \times K^{-1}}$$

ESPONTANEIDAD DE LAS REACCIONES QUÍMICAS:

ENERGÍA LIBRE DE GIBBS (ΔG) (ENERGÍA LIBRE O ENTALPÍA LIBRE).

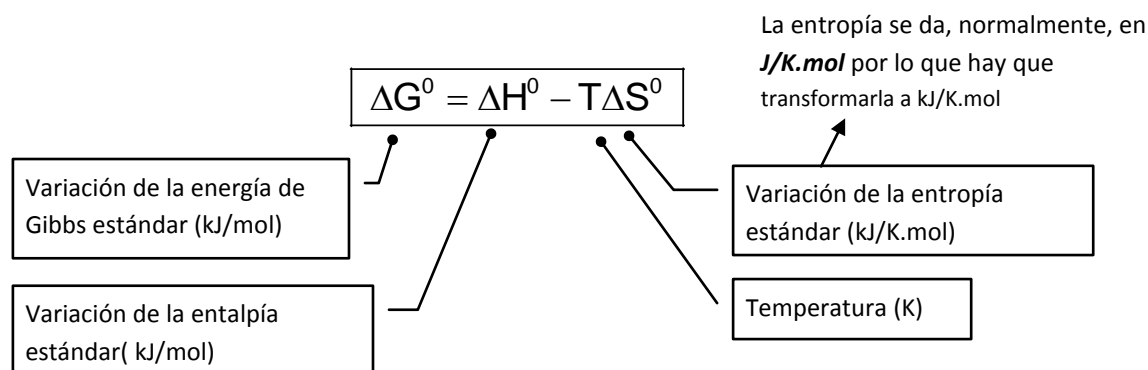
Usar el segundo principio de la termodinámica como criterio para saber si una reacción química es espontánea o no es complicado, ya que el enunciado hace referencia a **un sistema aislado** y una reacción química no lo es porque intercambia energía con el medio ambiente.

Realmente cuando se realiza una reacción química el sistema busca, no solamente el estado de mínima energía o entalpía, sino también el estado de máximo desorden o entropía.

Por tanto, para determinar la espontaneidad de una reacción química se define una nueva magnitud de estado, la **energía de Gibbs (G)**:

$$G = H - TS$$

Si consideramos que tanto la entalpía como la entropía están medidas en condiciones estándar, la energía de Gibbs, también estará medida en estas condiciones (G^0). Por tanto podremos escribir:



En procesos a T constante se define como: $G = H - T \times S$;

Por tanto: $\Delta G = \Delta H - T \times \Delta S$

En condiciones estándar: $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \cdot \Delta S^0$

En procesos **espontáneos** se cumple siempre que: $\Delta G < 0$

Si $\Delta G > 0$ la reacción **no es espontánea**.

Si $\Delta G = 0$ el sistema está **en equilibrio**.

G es una función de estado.

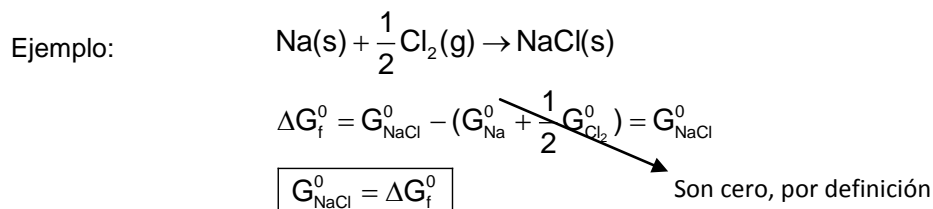
Al igual que el incremento entálpico el incremento de energía libre de una reacción puede obtenerse a partir de:

$$\Delta G^0_R = \sum \Delta G^0_{\text{Productos}} - \sum \Delta G^0_{\text{Reactivos}}$$

De forma idéntica a cómo se procedía en la medida de las entalpías, **la energía estándar de Gibbs es nula para los elementos en su forma física más estable a 298 K y 1 atm.**

Según esta convención **la energía estándar de Gibbs para un compuesto es igual a su energía de Gibbs estándar de formación.**

Energía libre de formación de un compuesto en condiciones estándar: “la variación de energía libre necesaria para formar un mol de compuesto a partir de sus elementos en su estado fundamental y condiciones estándar”



Si evaluamos la variación de la energía de Gibbs experimentada por una reacción química podemos predecir si el proceso va a ser espontáneo o no.

Como la variación de energía de Gibbs se calcula restando dos términos podemos tener:

$$\Delta G = \Delta H - T \times \Delta S$$

Signo de ΔH^0 y ΔS^0	Procesos para los que:		Signo de ΔG^0	Espontaneidad
Distinto signo	$\Delta H^0 > 0$	$\Delta S^0 < 0$	$\Delta G^0 > 0$	No espontánea a cualquier T
	$\Delta H^0 < 0$	$\Delta S^0 > 0$	$\Delta G^0 < 0$	Espontánea a cualquier T
Igual signo	$\Delta H^0 > 0$	$\Delta S^0 > 0$	$\Delta G^0 < 0$ a T alta	Espontánea al elevar T
	$\Delta H^0 < 0$	$\Delta S^0 < 0$	$\Delta G^0 < 0$ a T baja	Espontánea al bajar T

Ejercicios resueltos:

1.- Para una determinada reacción química $\Delta H^0 = -35,4 \text{ kJ}$ y $\Delta S^0 = -85,5 \text{ J K}^{-1}$

. Indique, justificando la respuesta, si:

- La reacción da lugar a un aumento o disminución del desorden del sistema.
- La reacción será espontánea a 298 K y condiciones estándar.

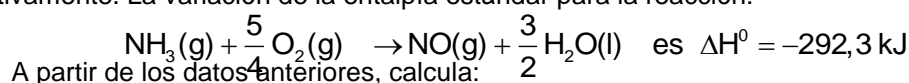
Solución:

- El valor negativo de ΔS^0 indica que en la reacción **hay una disminución de entropía** al pasar de los reactivos a los productos. Teniendo en cuenta que la entropía es una medida del desorden de un sistema, **en este caso, el sistema disminuye su desorden. Esto es, los productos pueden considerarse que están más ordenados que los reactivos.**
- Para determinar si la reacción es espontánea a 298 K calculamos el valor de la energía de Gibbs (tener en cuenta las unidades de la variación de entropía)

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0 = -35,4 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \left(-0,0855 \frac{\text{kJ}}{\text{K}} \right) = -9,9 \text{ kJ}$$

Como la energía de Gibbs es negativa **la reacción será espontánea a esa temperatura.**

2.- Las entalpías estándar de formación del $\text{NH}_3(\text{g})$ y del $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ son $-46,11$ y $-285,8 \text{ kJ mol}^{-1}$, respectivamente. La variación de la entalpía estándar para la reacción:



- La variación de entalpía estándar para la reacción:

$$\text{N}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NO}(\text{g})$$
- Justifica si la reacción anterior será o no espontánea.

Solución:

a) Calculamos la variación de entalpía para la reacción dada y resulta un valor

$$\Delta H^0 = 180,6 \text{ kJ/mol}$$

Reacción endotérmica.

b) Para determinar si la reacción es espontánea a 298 K deberíamos de determinar el signo de la energía de Gibbs:

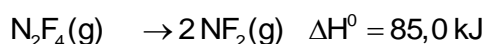
$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$$

No tenemos el valor de la variación de entropía pero podemos hacer una evaluación de la misma. Existe el mismo número de moles gaseosos en los reactivos y en los productos, podríamos considerar (si no tenemos más datos) que $\Delta S^0 = 0$

Por tanto la variación de energía de Gibbs va a ser positiva. **Reacción no espontánea a 298 K y 1 atm.**

Las reacciones para las cuales $\Delta H^0 > 0$ solo serán espontáneas si el término $T\Delta S^0$ es positivo, y mayor que ΔH^0 , lo que sucederá para reacciones en las que

$\Delta S^0 > 0$ (reacciones en las que aumente el desorden) y temperaturas altas.



3.-Para la reacción:

Indique y justifique si existen condiciones de temperatura en las que la reacción anterior será espontánea.

Solución:

Para determinar si la reacción es espontánea a 298 K determinamos el signo de la energía de Gibbs:

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$$

No tenemos el valor de la variación de entropía pero podemos hacer una evaluación de la misma. Existen dos moles de gas en los productos y solo uno en los reactivos. El número de moles de gas, por tanto, aumenta al pasar de los reactivos a los productos. En consecuencia el desorden aumenta al pasar de los reactivos a los productos.

Luego: $\Delta S^0 > 0$

Como tanto la variación de entalpía como la de entropía son positivas, **la variación de energía de Gibbs tenderá a ser negativa a temperaturas elevadas. La reacción tenderá a ser espontánea a altas temperaturas.**

4.-Para la reacción: $\text{H}_2\text{O}(\text{g}) + \frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2(\text{g}) \quad \Delta H^0 = 105,5 \text{ kJ}$

Indique y justifique si existen condiciones de temperatura en las que la reacción anterior será espontánea.

Solución:

Para determinar si la reacción es espontánea a 298 K determinamos el signo de la energía de Gibbs:

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$$

No tenemos el valor de la variación de entropía pero podemos hacer una evaluación de la misma. Existe un mol de gas en los productos y 1,5 moles de gas en los reactivos. El número de moles de gas, por tanto, disminuye al pasar de los reactivos a los productos. En consecuencia el desorden disminuye al pasar de los reactivos a los productos. Luego:

Como la variación de entalpía es positiva y la de entropía negativa, **la variación de energía de Gibbs será positiva a cualquier temperatura. La reacción será no espontánea a cualquier temperatura.**

5.- ¿Será o no espontánea la siguiente reacción $2\text{H}_2\text{O}_2(l) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(l) + \text{O}_2(g)$ sabiendo que ΔH_f° (kJ/mol) $\text{H}_2\text{O} = -285,8$; $\text{H}_2\text{O}_2 = -187,8$ y que S (J/molK) $\text{H}_2\text{O} = 69,9$; $\text{H}_2\text{O}_2 = 109,6$; $\text{O}_2 = 205,0$?

$$\Delta H^\circ = \sum \Delta H_f^\circ(\text{productos}) - \sum \Delta H_f^\circ(\text{reactivos}) = 2 \Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}) + \Delta H_f^\circ(\text{O}_2) - 2\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}_2) = 2\text{mol} \cdot (-285,8 \text{ kJ/mol}) + 0 - 2 \text{mol} \cdot (-187,8 \text{ kJ/mol}) = -196,0 \text{ kJ}$$

$$\Delta S^\circ = \sum S^\circ(\text{productos}) - \sum S^\circ(\text{reactivos}) = 2 S^\circ(\text{H}_2\text{O}) + S^\circ(\text{O}_2) - 2 S^\circ(\text{H}_2\text{O}_2) = 2\text{mol} \cdot (69,9 \text{ J/mol} \times \text{K}) + 1 \text{mol} \cdot (205,0 \text{ J/mol} \times \text{K}) - 2 \cdot (109,6 \text{ J/mol} \times \text{K}) = 126,0 \text{ J/K}$$

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ = -196,0 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \cdot 0,126 \text{ kJ/K} = -233,5 \text{ kJ}$$

luego será **espontánea**.
